

计算金属体系的Fermi Surface

最后编辑时间: 2024.1.2

support@pwm.mat.com

▼ 计算金属体系的Fermi Surface

- 简介
- 特性
- 安装
- 计算流程
- 示例

简介

Fermi Surface 计算模块是一个用于计算和可视化材料费米面的工具。费米面是材料中能量-动量关系的三维表示。结果对分析材料电导率、热导率以及其他电子输运性质有所帮助。

特性

1. 在处理费米面时，可以进行k点插值处理
2. 生成 `.bxsf` 格式的结果，可使用材料可视化软件，如XCrySDen或FermiSurfer进行可视化

安装

- Mcloud用户：
加载anaconda和fermi_surface环境: `module load conda fermi_surface`
- Mstation/Mcluster用户：
 - 下载脚本并配置环境变量
 - 加载anaconda环境 `module load conda`

计算流程

1. 使用fermi_surface.py脚本生成IN.KPT文件
2. 设置IN.KPT = T，使用PWmat进行自洽计算
3. 使用fermi_surface.py脚本进行后处理

示例

从官网下载[示例](#)，上传至服务器并解压。

1. 进入example_fermi_surface文件夹，进行计算需要用到的输入文件如下：

文件名	用途	说明
atom.config	结构文件	
etot.input	PWmat的参数文件	
IN.KPT	K点文件	在实际使用中，该文件需通过fermi_surface.py脚本产生
*.UPF	赝势文件	

2. 通过fermi_surface.py脚本产生IN.KPT文件

```
fermi_surface.py --generate --kmesh 17 17 17
```

--generate 告诉程序产生k点文件； --kmesh 17 17 17 告诉程序产生的k点网格为17×17×17。计算费米面推荐设置的k点网格间距为0.01-0.02 (单位： $2\pi/\text{\AA}$)。

3. 在etot.input中设置IN.KPT = T, 进行自洽计算

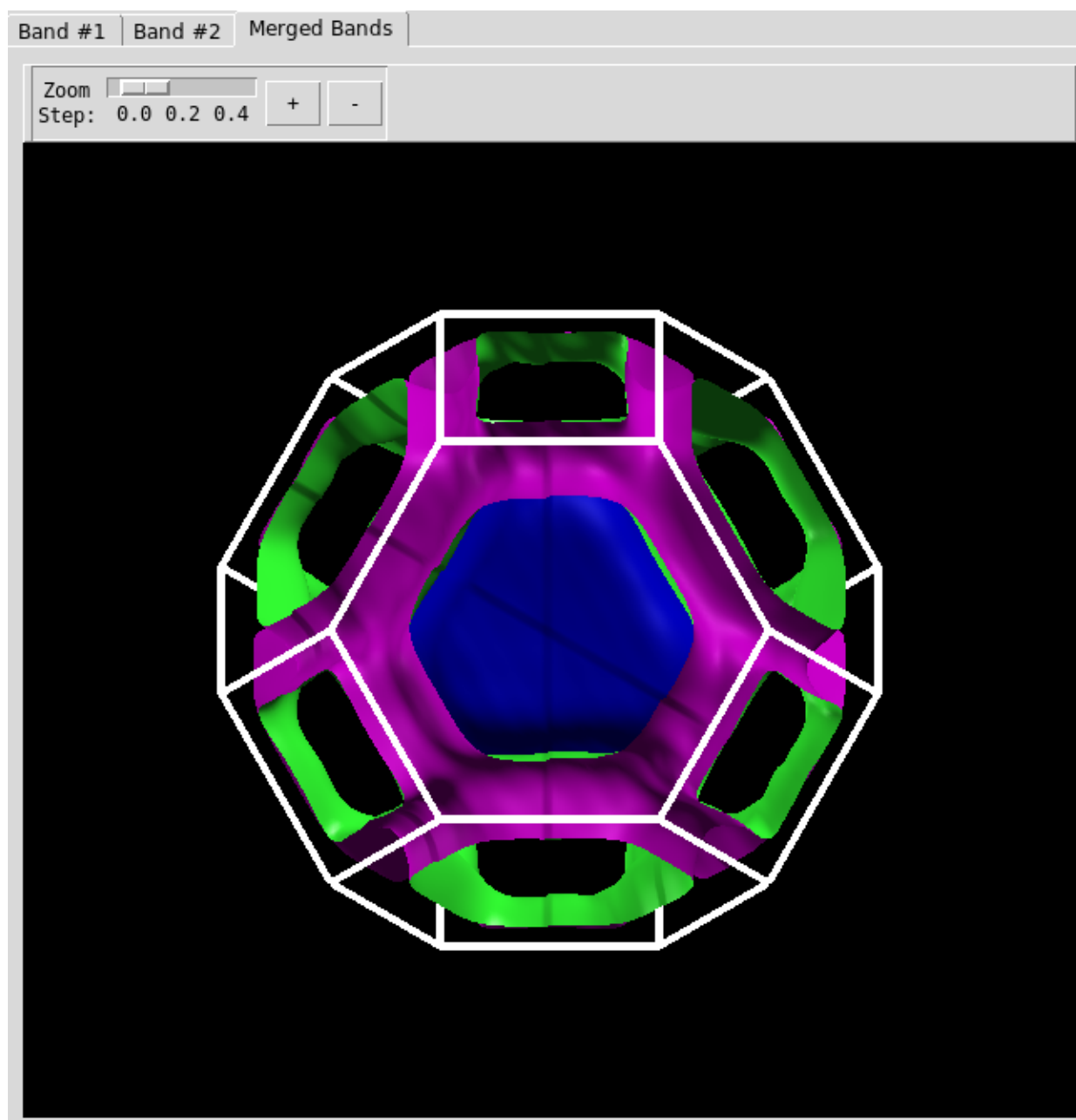
4. 等待计算正常结束后，使用fermi_surface.py脚本进行后处理

```
fermi_surface.py --kmesh 17 17 17 --interp 100 100 100
```

--kmesh 17 17 17 告诉程序计算的k点网格为17×17×17； --interp 100 100 100 告诉程序插值后的k点网格为100×100×100，若不设置该选项则不进行插值。

生成的结果文件为ebands3d.bxsf，可以使用XCrySDen或FermiSurfer进行可视化

XCrySDen结果示例(在Linux上执行xcrysden --bxsf ebands3d.bxsf):



FermiSurfer结果示例(在Windows上将ebands3d.bxsf文件拖拽到fermisurfer.exe上打开):

